Universidade Federal de Itajubá



Laboratório de Química Computacional

Manual de uso do

laqc\_mod

Rogério Ribeiro Macêdo

Itajubá

2023

Sumário

[Introdução 3](#_Toc146798269)

# Introdução

O laqc-mod.py tem por objetivo otimizar o processo de alteração dos arquivos de input do Gaussian, mais especificamente, seu uso se dá quando há mais de um arquivo a ser alterado. Ou seja, ele foi construído pensando em um procedimento onde o usuário precise alterar vários arquivos de input de várias estruturas moleculares e estas passarão pelo mesmo tipo de cálculo.

O script foi construído com a linguagem Python[[1]](#footnote-1), por esse motivo é executado via linha de comando, como mostrado da Figura 1:

1. https://www.python.org/ [↑](#footnote-ref-1)